

АЛГОРИТМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ДИСКРЕТНЫХ ПОЛУОГРАНИЧЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ, ЗАДАННЫХ НА КВАНТОВЫХ ГРАФАХ

С.И. Кадченко¹, А.В. Ставцева², Л.С. Рязанова¹, В.В. Дубровский¹

¹ Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, г. Магнитогорск, Российская Федерация

² ЗАО «Урал–Омега», г. Магнитогорск, Российская Федерация

E-mail: sikadchenko@mail.ru

Аннотация. Спектральные задачи для дифференциальных операторов, заданных на квантовых графах, представляют большой научный интерес. Это связано с необходимостью решения таких задач в квантовой механике, моделировании компьютерных сетей, обработке изображений, алгоритмах ранжирования, моделировании электрических, механических, акустических процессов, в сетях разнообразной природы, конструировании наносистем с заданными свойствами и других областях науки и техники. На сегодня разработана теоретическая часть решения прямых и обратных спектральных задач на квантовых графах. Но вычислительные алгоритмы, построенные на этих методах, вычислительно малоэффективны. Мы не встречали опубликованных работ, в которых были бы рассмотрены примеры численного решения спектральных задач на конечных связанных графах с большим количеством вершин и ребер. Поэтому разработка новых вычислительно эффективных алгоритмов численного решения спектральных задач, заданных на конечных связанных графах, является актуальной.

Разработана методика нахождения собственных значений краевых задач, заданных на конечных связанных графах, с необходимым количеством вершин и ребер. Для использования этой методики надо знать собственные значения и вектор собственных функций соответствующих невозмущенных вектор-операторов, которые, как правило, самосопряженные. Находить их вручную, в случае большого количества у графа вершин и ребер, достаточно сложно. Это привело к необходимости написать пакет программ в математической среде MAPLE, позволяющий в символьном режиме находить трансцендентные уравнения для вычисления собственных значений и нахождения собственных функций не возмущенных краевых задач. Приведены примеры вычисления собственных значений для квантового графа, моделирующего молекулу ароматического соединения антрацена.

Ключевые слова: асимптотические формулы; собственные значения и собственные функции; дискретные и самосопряженные операторы; обратные спектральные задачи; метод Галеркина.

Введение. В статьях [1–18] разработан численный метод нахождения собственных значений дискретного полуограниченного дифференциального оператора вида $L=T+P$, заданного в сепарабельном гильбертовом пространстве H с областью определения $D_L \in H$. Здесь T – самосопряженный оператор такого же порядка, как и оператор L . Рассмотрим краевую задачу, порожденную оператором L :

$$Lu = \mu u, \quad Gu|_{\Gamma} = 0, \quad (1)$$

где Γ – граница области D_L . Для нахождения собственных значений $\{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}$ спектральной задачи (1) произведем дискретизацию области D_L и построим последовательность $\{H_n\}_{n=1}^{\infty}$ конечномерных пространств, которая полна в H . Подберем ортонормированные базисы $\{\varphi_k\}_{k=1}^n$ пространств $H_n \subseteq H$ таким образом, чтобы они удовлетворяли граничным условиям задачи (1).

В статье [16] доказана теорема.

Теорема. *Приближенные собственные значения μ_n спектральной задачи (1) находятся по линейным формулам*

$$\tilde{\mu}_n(n) = (L\varphi_n, \varphi_n) + \tilde{\delta}_n, \quad n \in N, \quad (2)$$

где $\tilde{\delta}_n = \sum_{k=1}^{n-1} [\tilde{\mu}_k(n-1) - \tilde{\mu}_k(n)]$, $\tilde{\mu}_k(n)$ – n -е приближения по Галеркину к соответствующим собственным значениям μ_k спектральной задачи. При этом $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{\delta}_n = 0$.

За систему координатных функций $\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty}$ возьмем систему собственных функций спектральной задачи

$$Tv = \lambda v, \quad Gv|_{\Gamma} = 0. \quad (3)$$

С учетом собственных значений $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$ и ортонормированных собственных функций $\{v_k\}_{k=1}^{\infty}$ оператора T формулы (2) записываются в виде

$$\tilde{\mu}_n(n) = \lambda_n + (Pv_n, v_n) + \tilde{\delta}_n, \quad n \in N. \quad (4)$$

Линейные формулы (4) позволяют находить приближенные собственные значения с необходимым порядковым номером, зная спектральные характеристики соответствующего невозмущенного оператора. Они позволяют находить собственные значения оператора независимо от собственных значений с меньшими порядковыми номерами. Решают проблему вычисления всех точек спектра дискретного полуограниченного оператора $l_j = 1$ с любыми порядковыми номерами. С возрастанием порядкового номера собственного значения оператора $B_{5_n} = \frac{4}{b_n} (40 + 28 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 52 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 75 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 9 \cos(8\sqrt{\lambda_n}))$ точность его вычисления по формулам (4) возрастает.

В данной статье рассмотрены вопросы нахождения приближенных собственных значений на квантовых графах с использованием формулы (4).

2. Прямые спектральные задачи на квантовых графах. Пусть $G = G(V, E)$ – конечный связанный ориентированный граф с последовательно соединенными ребрами. Через $V = \{V_i\}_{i=1}^{j_0}$ обозначено множество вершин графа G , а через $E = \{E_j\}_{j=1}^{j_0}$ – множество его ребер. Каждое ребро E_j графа G имеет длину $l_j > 0$ и площадь поперечного сечения $d_j > 0$. На каждом ребре E_j графа G задан дискретный полуограниченный вектор-оператор

$$L = (L_1, L_2, \dots, L_{j_0}), \quad (5)$$

действующий в гильбертовом пространстве

$$H = L^2(G) = \{G = (G_1, G_2, \dots, G_{j_0}), G_j \in L^2[0, l_j], j = \overline{1, j_0}\}$$

со скалярным произведением

$$(g, h) = \sum_{j=1}^{j_0} d_j \int_0^{l_j} g_j h_j ds, \quad g, h \in H. \quad (6)$$

Для компонент вектор-оператора $L = T + P$ рассмотрим спектральные задачи

$$(T_j + P_j)u_j = \mu u_j, \quad u_j = u_j(s_j), \quad j = \overline{1, j_0}, \quad (7)$$

$$u_j(0) = u_k(0) = u_m(l_m) = u_n(l_n) = 0, \quad (8)$$

$$\sum_{E_j \in E^{\alpha}(V_i)} d_j \frac{du_j}{ds_j} \Big|_{s_j=0} - \sum_{E_m \in E^{\omega}(V_i)} d_m \frac{du_m}{ds_m} \Big|_{s_m=l_m} = 0, \quad (9)$$

где $T_j u_j = -\frac{d^2 u_j}{ds_j^2}$; $P_j u_j = \sum_{k=1}^2 p_{jk}(s_j) u_j^{(2-k)}$; $u_j, p_{jk} \in W_2^2[0, l_j]$; $k=1, 2$; $s_j \in [0, l_j]$.

Граничные условия (8) означают, что вектор-функция $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{j_0})$ непрерывна во внутренних вершинах графа G , а условие (9) – что поток через каждую вершину графа G равен нулю. В формулах (9) через $E^{\alpha(\omega)}(V_i)$ обозначены множества дуг с началом (концом) в вершинах V_i , а $E_j, E_k \in E^\alpha(V_i)$, $E_m, E_n \in E^\omega(V_i)$.

Найдем собственные значения и собственные вектор-функции для вектор-оператора $T = (T_1, T_2, \dots, T_{j_0})$. Для этого рассмотрим на графе G следующие спектральные задачи:

$$T_j v_j = \lambda v_j, \quad v_j = v_j(s_j), \quad j = \overline{1, j_0}, \quad (10)$$

$$v_j(0) = v_k(0) = v_m(l_m) = v_n(l_n) = 0, \quad (11)$$

$$\sum_{E_j \in E^\alpha(V_i)} d_j \left. \frac{dv_j}{ds_j} \right|_{s_j=0} - \sum_{E_m \in E^\omega(V_i)} d_m \left. \frac{dv_m}{ds_m} \right|_{s_m=l_m} = 0. \quad (12)$$

Собственные значения $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$ спектральной задачи (10)–(12) занумеруем в порядке неубывания их величин. Как правило, система собственных вектор-функций $\{v_n = (v_{1n}, v_{2n}, \dots, v_{j_0 n})\}_{n=1}^\infty$ задачи (10)–(12) ортогональная и ее легко сделать нормированной. Если она не ортогональная, то ее необходимо разложить в ряды Фурье по системе вектор-функций $\{\varphi_n = (\varphi_{1n}, \varphi_{2n}, \dots, \varphi_{j_0 n})\}_{n=1}^\infty$ и нормализовать.

Нахождение собственных значений λ_n и соответствующих им собственных вектор-функций $v_n = (v_{1n}, v_{2n}, \dots, v_{j_0 n})$ спектральных задач (10)–(12) для любых конечных замкнутых графов с большим количеством вершин приводит к большому количеству и громоздкости аналитических вычислений. Для упрощения этого процесса в среде математического пакета MAPLE был написан пакет программ, позволяющий находить необходимое количество этих спектральных характеристик для любых конечных графов [18].

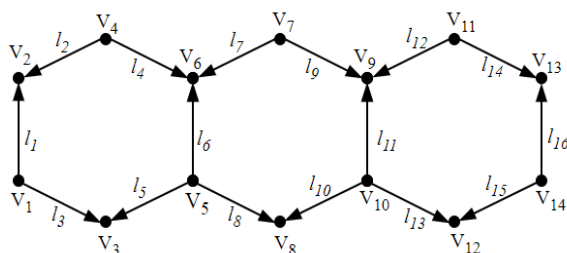
На основании формул (4) и (6) следует, что приближенные собственные значения вектор-оператора L , действующего в сепарабельном гильбертовом пространстве $W_2^2(G)$, находятся по формулам

$$\tilde{\mu}_n(n) = \lambda_n + \sum_{j=1}^{j_0} d_j \chi_j(s) \int_0^{l_j} v_{jn}(s) \sum_{k=1}^2 p_{jk}(s) v_{jn}^{(2-k)}(s) ds + \tilde{\delta}_n, \quad n \in N. \quad (13)$$

Здесь $\chi_j(s) = \begin{cases} 1, & s \in [0, l_j], \\ 0, & s \notin [0, l_j]. \end{cases}$ Таким образом, по формуле (13) можно вычислять приближенные

собственные значения прямой спектральной задачи (10)–(12), если заданы на ребрах графа G все функции p_{jk} .

3. Численные эксперименты. Проверку разработанной методики вычисления собственных значений дискретных полуограниченных операторов заданных на геометрических графах проведем на примере молекул ароматических соединений антрацена $C_{14}H_{10}$. Граф, моделирующий молекулу антрацена, состоит из четырнадцати вершин ($i_0 = 14$) и шестнадцати ребер ($j_0 = 16$) (см. рисунок). Нахождение собственных значений λ_n и соответствующих им собственных вектор-функций v_n оператора T при решении спектральных задач (10)–(12) для конечных замкнутых графов с большим количеством вершин вызывает большие аналитические трудности. Поэтому в среде аналитических вычислений MAPLE был написан пакет программ, позволяющих находить эти спектральные характеристики для любых конечных ориентированных графов [18].



Разбиение ориентированного графа, моделирующего молекулу антрацена на вершины и ребра

Так как длины всех ребер для молекулы антрацена одинаковы, можно считать, что $l_j = 1$ и $d_j = 1$ для всех $j = \overline{1, j_0}$. Используя написанный пакет программ, получили трансцендентное уравнение для нахождения собственных значений λ_n спектральной задачи (10)–(12)

$$62\sin(\sqrt{\lambda}) + 190\sin(3\sqrt{\lambda}) + 384\sin(5\sqrt{\lambda}) + 463\sin(7\sqrt{\lambda}) + 415\sin(9\sqrt{\lambda}) + 225\sin(11\sqrt{\lambda}) + 81\sin(13\sqrt{\lambda}) = 0. \quad (14)$$

Компоненты v_{j_n} собственных вектор-функций v_n спектральной задачи (10)–(12), которые соответствуют собственным значениям λ_n , записываются в виде

$$v_{j_n} = C_{j_n} \left[A_{j_n} \sin(\sqrt{\lambda_n} s) + B_{j_n} \cos(\sqrt{\lambda_n} s) \right], \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} A_{1_n} &= \frac{4}{a_n} (8\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 23\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 16\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 9\sin(7\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{1_n} &= \frac{4}{b_n} (58 + 88\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 49\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 9\cos(6\sqrt{\lambda_n})), \\ A_{2_n} &= \frac{4}{a_n} (26\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 61\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 48\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 21\sin(7\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{2_n} &= \frac{4}{b_n} (16 + 30\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 15\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 7\cos(6\sqrt{\lambda_n})), \\ A_{3_n} &= -\frac{4}{a_n} (8\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 23\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 16\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 9\sin(7\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{3_n} &= \frac{4}{b_n} (58 + 88\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 49\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 9\cos(6\sqrt{\lambda_n})), \\ A_{4_n} &= -\frac{4}{a_n} (26\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 61\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 48\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 21\sin(7\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{4_n} &= \frac{12}{b_n} (16 + 30\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 15\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 7\cos(6\sqrt{\lambda_n})), \\ A_{5_n} &= \frac{4}{a_n} (41\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 85\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 80\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 37\sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 9\sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{5_n} &= \frac{4}{b_n} (40 + 28\cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 52\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 75\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 9\cos(8\sqrt{\lambda_n})), \\ A_{6_n} &= \frac{4}{a_n} (5\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 9\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 16\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 13\sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 9\sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\ B_{6_n} &= \frac{4}{b_n} (40 + 28\cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 52\cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 75\cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 9\cos(8\sqrt{\lambda_n})), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{7_n} &= \frac{2}{a_n} (93 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 212 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 214 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 124 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 45 \sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{7_n} &= \frac{2}{b_n} (64 + 99 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 127 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 73 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 15 \cos(8\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{8_n} &= -\frac{8}{a_n} (23 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 47 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 48 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 25 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 9 \sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{8_n} &= \frac{4}{b_n} (40 + 75 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 52 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 28 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 9 \cos(8\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{9_n} &= -\frac{2}{a_n} (93 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 212 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 214 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 124 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 45 \sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{9_n} &= \frac{2}{b_n} (64 + 99 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 127 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 73 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 45 \cos(8\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{10_n} &= \frac{2}{a_n} (217 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 127 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 234 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 185 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + 87 \sin(9\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{10_n} &= \frac{2}{b_n} (29 + 84 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 101 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 107 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 60 \cos(8\sqrt{\lambda_n}) + 27 \cos(10\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{11_n} &= -\frac{2}{a_n} (8 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + \sin(3\sqrt{\lambda_n}) - 30 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) - 63 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) - 30 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) - 51 \sin(11\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{11_n} &= \frac{2}{b_n} (29 + 84 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 101 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 107 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 60 \cos(8\sqrt{\lambda_n}) + 27 \cos(10\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{12_n} &= \frac{1}{a_n} (103 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 291 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 392 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 371 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\
 &\quad + 261 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 81 \sin(11\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{12_n} &= \frac{3}{b_n} (5 + 45 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 60 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 84 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 51 \cos(8\sqrt{\lambda_n}) + 27 \cos(10\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{13_n} &= -\frac{4}{a_n} (34 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 108 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 132 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 124 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\
 &\quad + 69 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 27 \sin(11\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{13_n} &= \frac{2}{b_n} (29 + 84 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 101 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 107 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 60 \cos(8\sqrt{\lambda_n}) + 27 \cos(10\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{14_n} &= -\frac{1}{a_n} (103 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 291 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 392 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 371 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\
 &\quad + 216 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 81 \sin(11\sqrt{\lambda_n})), \\
 B_{14_n} &= \frac{3}{b_n} (5 + 45 \cos(2\sqrt{\lambda_n}) + 60 \cos(4\sqrt{\lambda_n}) + 84 \cos(6\sqrt{\lambda_n}) + 51 \cos(8\sqrt{\lambda_n}) + 27 \cos(10\sqrt{\lambda_n})), \\
 A_{15_n} &= \frac{1}{a_n} (105 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 266 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 482 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 523 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\
 &\quad + 442 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 225 \sin(11\sqrt{\lambda_n})), \quad B_{15_n} = 1, \\
 A_{16_n} &= \frac{1}{a_n} (19 \sin(\sqrt{\lambda_n}) + 114 \sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 286 \sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 403 \sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\
 &\quad + 388 \sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 225 \sin(11\sqrt{\lambda_n}) + 81 \sin(13\sqrt{\lambda_n})), \quad B_{16_n} = 1,
 \end{aligned}$$

$$a_n = 43\sin(\sqrt{\lambda_n}) + 154\sin(3\sqrt{\lambda_n}) + 320\sin(5\sqrt{\lambda_n}) + 403\sin(7\sqrt{\lambda_n}) + \\ + 388\sin(9\sqrt{\lambda_n}) + 225\sin(11\sqrt{\lambda_n}) + 81\sin(13\sqrt{\lambda_n}), \\ b_n = 16 + 11\sin(2\sqrt{\lambda_n}) + 143\sin(4\sqrt{\lambda_n}) + 177\sin(6\sqrt{\lambda_n}) + 244\sin(8\sqrt{\lambda_n}) + \\ + 144\sin(10\sqrt{\lambda_n}) + 81\sin(12\sqrt{\lambda_n}).$$

Система $\{v_n\}_{n=1}^{\infty}$ ортогональна в смысле скалярного произведения (6). Множители C_{j_n} , входящие в (15), находятся из условия нормировки этой системы.

В табл. 1, 2 приведены результаты вычисления первых собственных значений вектор-оператора L , заданного на графе, который моделирует молекулу антрацена. Расчеты были проведены для следующих заданных функций $p_{jk}(s_j)$ ($1 \leq j \leq 16$, $k = 1, 2$, $s_j \in [0, l_j]$):

$$p_{j_1} = 0, 1 \leq j \leq 16, p_{1_2} = s^2 + 5, p_{2_2} = s^2 + 5s + 1, p_{3_2} = s^2 + 5s - 1, p_{4_2} = 5s + 1, p_{5_2} = 5s - 1, \\ p_{6_2} = 0, p_{7_2} = 5s + 1, p_{8_2} = 5s - 1, p_{9_2} = s^2 + 5s + 1, p_{10_2} = s^2 + 5s - 1, \\ p_{11_2} = s^2 + 5s, p_{12_2} = s^2 + 5s + 1, p_{13_2} = s^2 + 5s - 1, p_{14_2} = 5s + 1, p_{15_2} = 5s - 1, p_{16_2} = 15s^2 - 9.$$

Таблица 1

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \hat{\mu}_n $
1	1,941823	-0,233790	2,175613
2	2,341721	2,639681	0,297960
3	2,985317	3,237994	0,252677
4	3,399854	3,402611	0,002757
5	3,735492	4,079347	0,343855
6	4,433908	4,615242	0,181334
7	5,174741	5,566181	0,391440
8	9,639011	9,777037	0,138026
9	12,046596	11,989504	0,057100
10	14,999971	15,078706	0,078740
11	22,637372	22,584269	0,053100
12	26,389451	26,283345	0,106110
13	28,364816	28,264205	0,100610
14	28,927379	29,020026	0,092650
15	30,917058	30,892965	0,024090
16	31,675799	31,728728	0,052930
17	36,423006	36,537131	0,114120
18	41,600790	41,681763	0,080970
19	47,346396	47,400335	0,053940
20	60,803221	60,734402	0,068820

Таблица 2

n	$\tilde{\mu}_n$	$\hat{\mu}_n$	$ \tilde{\mu}_n - \hat{\mu}_n $
32	133,782235	133,836558	0,054400
33	138,087581	138,073378	0,014200
34	139,363870	139,410644	0,046700
35	149,351679	149,400349	0,048600
36	160,022389	160,057500	0,035100
37	171,268499	171,293752	0,025300
38	196,385492	196,337380	0,048100
39	207,948995	207,929674	0,019300
40	213,591153	213,560590	0,030600
41	215,799666	215,842331	0,042600
42	221,265569	221,252390	0,013200
43	222,830313	222,882445	0,052100
44	235,432590	235,485607	0,053000
45	248,847190	248,889225	0,042000
46	262,838151	262,872782	0,034600
47	293,789481	293,775166	0,014300
48	307,937209	307,962172	0,025000
49	314,826087	314,833452	0,007400
50	317,553092	317,621732	0,068600
51	324,179804	324,204533	0,024700

В табл. 1, 2 под $\tilde{\mu}_n$ обозначены собственные значения спектральной задачи (7)–(9), которые вычислены по формулам (13), а $\hat{\mu}_n$ – вычисленные методом Галеркина с использованием скалярного произведения (6).

4. Заключение. Использование написанного в математической среде MAPLE пакета программ для нахождения собственных значений λ_n и соответствующих им собственных вектор-функций v_n оператора T , при решении прямых спектральных задач (10)–(12), заданных на конечных ориентированных графах, значительно упрощает нахождение собственных значений вектор-оператора L по формулам (13).

Проведенные многочисленные вычислительные эксперименты по вычислению собственных значений оператора L , заданного на графе G , показали высокую вычислительную эффективность разработанной методики.

Литература

1. Вычисление первых собственных чисел краевой задачи гидродинамической устойчивости между параллельными плоскостями при малых числах Рейнольдса / В.А. Садовничий, В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко // Доклады Академии наук. – 1997. – Т. 355, № 5. – С. 605–608.
2. Кадченко, С.И. Метод регуляризованных следов / С.И. Кадченко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – № 37(170), Вып. 4. – С. 4–23.
3. Кадченко С.И., Какушкин С.Н. Численные методы нахождения собственных чисел и собственных функций возмущенных самосопряженных операторов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 27(286), Вып. 13. – С. 45–57.
4. Кадченко, С.И. Вычисление собственных значений возмущенных дискретных полуограниченных операторов / С.И. Кадченко, И.И. Кинзина // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006. – Т. 46, № 7. – С. 1265–1272.
5. Кадченко, С.И. Численный метод нахождения собственных значений дискретных полуограниченных снизу операторов / С.И. Кадченко, Л.С. Рязанова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2011. – № 17(234), Вып. 8. – С. 46–51.
6. Кадченко, С.И. Вычисление рядов Релея–Шредингера возмущенных самосопряженных операторов / С.И. Кадченко // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2007. – Т. 47, № 9. – С. 1494–1505.
7. Кадченко, С.И. Алгоритм нахождения собственных функций возмущенных самосопряженных операторов методом регуляризованных следов / С.И. Кадченко, С.Н. Какушкин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 40(299), Вып. 14. – С. 83–88.
8. Кадченко, С.И. Численный метод решения обратных задач, порожденных возмущенными самосопряженными операторами, методом регуляризованных следов / С.И. Кадченко // Вестник Самарского университета. Естественная серия. – 2013. – № 6(107). – С. 23–30.
9. Computation of the First Eigenvalues of a Discrete Operator / V.V. Dubrovskii, S.I. Kadchenko, V.F. Kravchenko, V.A. Sadovnichii // Электромагнитные волны и электронные системы. – 1998. – Т. 3, № 2. – С. 4–7.
10. Кадченко, С.И. Численный метод решения обратных спектральных задач, порожденных возмущенными самосопряженными операторами / С.И. Кадченко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 4. – С. 15–25.
11. Кадченко, С.И. Вычисление значений собственных функций дискретных полуограниченных операторов методом регуляризованных следов / С.И. Кадченко, С.Н. Какушкин // Вестник Самарского университета. Естественная серия. – 2012. – № 6(97). – С. 13–21.
12. Кадченко, С.И. Алгоритм решения обратных задач, порожденных возмущенными самосопряженными операторами / С.И. Кадченко // Актуальные проблемы современной науки и техники и образования. – 2015. – Т. 3. – С. 138–141.
13. Обратная спектральная задача определения неоднородности упругого стержня / С.И. Кадченко, Г.А. Закирова, Л.С. Рязанова, О.А. Торшина // Актуальные проблемы современной науки и техники и образования. – 2018. – Т. 9, № 2. – С. 42–45.
14. Kadchenko, S.I. A Numerical Method for Inverse Spectral Problems / S.I. Kadchenko, G.A. Zakirova // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2015. – Т. 8, № 3. – С. 116–126.
15. Kadchenko, S.I. Calculation of Eigenvalues of Discrete Semibounded Differential Operators / S.I. Kadchenko, G.A. Zakirova // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2017. – Vol. 4, Iss. 1. – P. 38–47.
16. Кадченко, С.И. Вычисление собственных чисел эллиптических дифференциальных операторов с помощью теории регуляризованных следов / С.И. Кадченко, О.А. Торшина // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2016. – Т. 8. – С. 36–43.

17. Новый метод приближенного вычисления первых собственных чисел спектральной задачи гидродинамической теории устойчивости течения Пуазейля в круглой трубе / В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, В.Ф. Кравченко, В.А. Садовничий // Доклады Академии наук. – 2001. – Т. 380, № 2. – С. 160–163.

18. Программа решения самосопряженных спектральных задач на конечных связанных ориентированных графах: Свидетельство № 2021660658 / А.В. Ставцева; правообладатель Ставцева А.В. – 2021660658; заявление 10.06.2021, зарегистрир. 29.07.2021, реестр программы на ЭВМ.

Поступила в редакцию 20 октября 2022 г.

Сведения об авторах

Кадченко Сергей Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной математики и информатики, Магнитогорский государственный технический университет имени Г.И. Носова, г. Магнитогорск, Российская Федерация, e-mail: sikadchenko@mail.ru

Ставцева Анастасия Викторовна – начальник отдела ИТ, ЗАО «Урал-Омега», г. Магнитогорск, Российская Федерация, e-mail: avstavtceva@gmail.com

Рязанова Любовь Сергеевна – кандидат педагогических наук, доцент кафедры прикладной математики и информатики, Магнитогорский государственный технический университет имени Г.И. Носова, г. Магнитогорск, Российская Федерация, e-mail: ryazanovals23@gmail.com

Дубровский Владислав Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент, Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, г. Магнитогорск, Российская Федерация, e-mail: vvdubrov@mail.ru

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 1, pp. 16–25

DOI: 10.14529/mmph230102

ALGORITHMS FOR THE COMPUTATION OF THE EIGENVALUES OF DISCRETE SEMI-BOUNDED OPERATORS DEFINED ON QUANTUM GRAPHS

S.I. Kadchenko¹, A.V. Stavtceva², L.S. Ryazanova¹, V.V. Dubrovskii¹

¹ G.I. Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russian Federation
E-mail: sikadchenko@mail.ru, ryazanovals23@gmail.com, vvdubrov@mail.ru

² Ural-Omega, Magnitogorsk, Russian Federation
E-mail: avstavtceva@gmail.com

Abstract. Spectral problems for differential operators defined on quantum graphs are of great scientific interest related to problems in quantum mechanics, computer network modeling, image processing, ranking algorithms, modeling of electrical, and mechanical and acoustic processes, in networks of a diverse nature, in designing nano systems with prescribed properties and in other areas. Theoretical solutions of direct and inverse spectral problems on quantum graphs have been developed, but computational algorithms based on these methods are computationally inefficient. We have not seen any published works that consider examples of numerical solutions of spectral problems on finite connected graphs with a large number of vertices and edges. Therefore, the development of new computationally effective algorithms for numerical solution of spectral problems given on finite connected graphs is urgent.

This paper develops a technique for finding the eigenvalues of boundary value problems on finite connected graphs with a required number of vertices and edges. To use this technique, it is necessary to know the eigenvalues and vectors of the eigenfunctions of corresponding unperturbed vector operators which are usually self-adjoint. Finding them manually, if the graph has a large number of vertices and edges, is difficult. This led to writing a package of programs in the mathematical environment Maple to find transcendental equations in the symbolic mode to calculate eigenvalues and find the eigenfunctions of unperturbed boundary value problems. Examples of calculating eigenvalues for a quantum graph which models an anthracene aromatic compound molecule are presented.

Keywords: asymptotic formulas; eigenvalues and eigenfunctions; discrete and self-adjoint operators; inverse spectral problems; Galerkin method.

References

1. Sadovnichiy V.A., Dubrovskiy V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F. Vychislenie pervykh sobstvennykh chisel kraevoy zadachi gidrodinamicheskoy ustoychivosti mezhdu parallel'nymi ploskostyami pri malykh chislakh Reynol'dsa (The Calculation of the First Eigenvalues of the Boundary Value Problem of the Theory of Hydrodynamic Stability of the Flow Between Two Parallel Planes at Small Reynolds Numbers). *Doklady Akademii nauk*, 1997, Vol. 355, no. 5, pp. 605–608. (in Russ.).
2. Kadchenko S.I. Method of Regularized Traces. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2009, no. 37(170), Iss. 4, pp. 4–23. (in Russ.).
3. Kadchenko S.I., Kakushkin S.N. The Numerical Methods of Eigenvalues and Eigenfunctions of Perturbed Self-Adjoin Operator Finding. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2012, no. 27(286), Iss. 13, pp. 45–57. (in Russ.).
4. Kadchenko S.I., Kinzina I.I. Computation of Eigenvalues of Perturbed Discrete Semibounded Operators. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2006, Vol. 46, Iss. 7, pp. 1200–1206. DOI: 10.1134/S0965542506070116
5. Kadchenko S.I., Ryazanova L.S. Numeric Method of Finding the Eigenvalues for the Discrete Lower Semibounded Operators. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2011, no. 17(234), Iss. 8, P. 46–51. (in Russ.).
6. Kadchenko S.I. Computing the Sums of Rayleigh–Schrödinger Series of Perturbed Self-Adjoint Operators. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2007, Vol. 47, Iss. 9, pp. 1435–1445. DOI: 10.1134/S0965542507090059
7. Kadchenko, S.I., Kakushkin S.N. The Algorithm of Finding of Meanings of Eigenfunctions of Perturbed Self-Adjoin Operators Via Method of Regularized Traces. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2012, no. 40(299), Iss. 14, pp. 83–88. (in Russ.).
8. Kadchenko S.I. Numerical Method for the Solution of Inverse Problems Generated by Perturbations of Self-Adjoint Operators by Method of Regularized Traces. *Vestnik SamGU. Estestvenno-Nauchnaya Ser.*, 2013, Iss. 6(107), pp. 23–30. (in Russ.).
9. Dubrovskii V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F., Sadovnichii V.A. Computation of the first eigenvalues of a discrete operator. *Electromagnetic waves and electronic systems*, 1998, Vol. 3, no. 2, pp. 4–7.
10. Kadchenko S.I. A Numerical Method for Solving Inverse Problems Generated by the Perturbed Self-Adjoint Operators. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2013, Vol. 6, no. 4, pp. 15–25. (in Russ.).
11. Kadchenko S.I., Kakushkin S.N. The Calculating of Meanings of Eigen Functions of Discrete Semibounded from below Operators via Method of Regularized Traces. *Vestnik Samarskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Estestvenno-Nauchnaya Seriya*, 2012, no. 6(97), pp. 13–21. (in Russ.).
12. Kadchenko S.I. Algoritm resheniya obratnykh zadach, porozhdennykh vozmushchennymi samosopryazhennymi operatorami (The Algorithm for solving inverse problems generated by perturbed self-adjoint operators). *Aktual'nye problemy sovremennoy nauki i tekhniki i obrazovaniya (Actual Problems of Modern Science and Technology and Education)*, 2015, Vol. 3, pp. 138–141. (in Russ.).
13. Kadchenko S.I., Zakirova G.A., Ryazanova L.S., Torshina O.A. Obratnaya spektral'naya zadacha opredeleniya neodnorodnosti uprugogo sterzhnya (Inverse spectral problem of determining the inhomogeneity of an elastic rod). *Aktual'nye problemy sovremennoy nauki i tekhniki i obrazovaniya*, 2018, Vol. 9, no. 2, pp. 42–45. (in Russ.).
14. Kadchenko S.I., Zakirova G.A. A Numerical Method for Inverse Spectral Problems. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming and Computer Software"*, 2015, Vol. 8, no. 3, pp. 116–126. (in Russ.).
15. Kadchenko S.I., Zakirova G.A. Calculation of Eigenvalues of Discrete Semibounded Differential Operators. *J. Comp. Eng. Math.*, 2017, Vol. 4, Iss. 1, pp. 38–47. DOI: 10.14529/jcem170104

16. Kadchenko S.I., Torshina O.A. Calculation of Eigenvalues of Elliptic Differential Operators using Regularized Trace Theory. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2016, Vol. 8, Iss. 2, pp. 36–43. DOI: 10.14529/mmph160205

17. Dubrovskii V.V., Kadchenko S.I., Kravchenko V.F., Sadovnichii V.A. New Method of Approximated Calculus of the Maiden Eigenvalues of a Spectral Problem of Hydrodynamic Stability of Current Puzel in a Round Tube. *Proc. Academy of Sciences*, 2001, Vol. 380, no. 2, pp. 160–163.

18. *The Program for Solving Self-Adjoint Spectral Problems on Finite Connected Oriented Graphs*: Certificate no. 2021660658, Stavtceva A.V.; copyright Stavtceva A.V., registration date 29.07.2021.

Received October 20, 2022

Information about the authors

Kadchenko Sergey Ivanovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Applied Mathematics and Informatics Department, G.I. Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russian Federation, e-mail: sikadchenko@mail.ru

Stavtceva Anastasiya Viktorovna is Head of IT Department, Ural-Omega CJSC, Magnitogorsk, Russian Federation, e-mail: avstavtceva@gmail.com

Ryazanova Lyubov' Sergeevna is Cand. Sc. (Pedagogical), Associate Professor, Department of Applied Mathematics and Informatics, G.I. Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russian Federation, e-mail: ryazanovals23@gmail.com

Dubrovsky Vladislav Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, G.I. Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russian Federation, e-mail: vvdubrov@mail.ru